

Albano Cossaro

acossaro@units.it, 4° piano

Elettra

Laboratorio ANCHOR

Studio di film organici su metalli
Proprietà elettroniche statiche e dinamiche



Organic Electronics

OLED
solar cells



Luminescence,
light absorption

Market

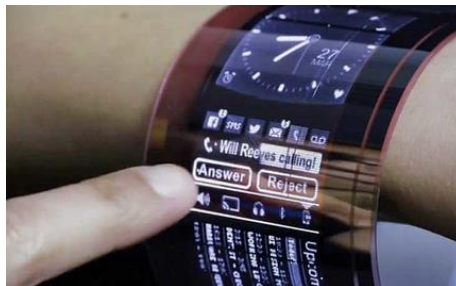
Samsung,
May 2019



Printing technology

Prototype

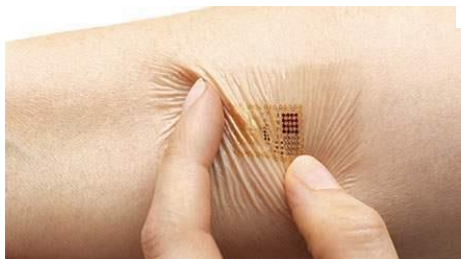
Flexible, wearable
devices



Functional materials

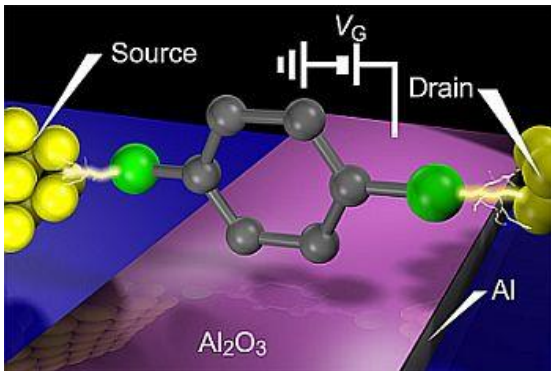
Fundamental
Research

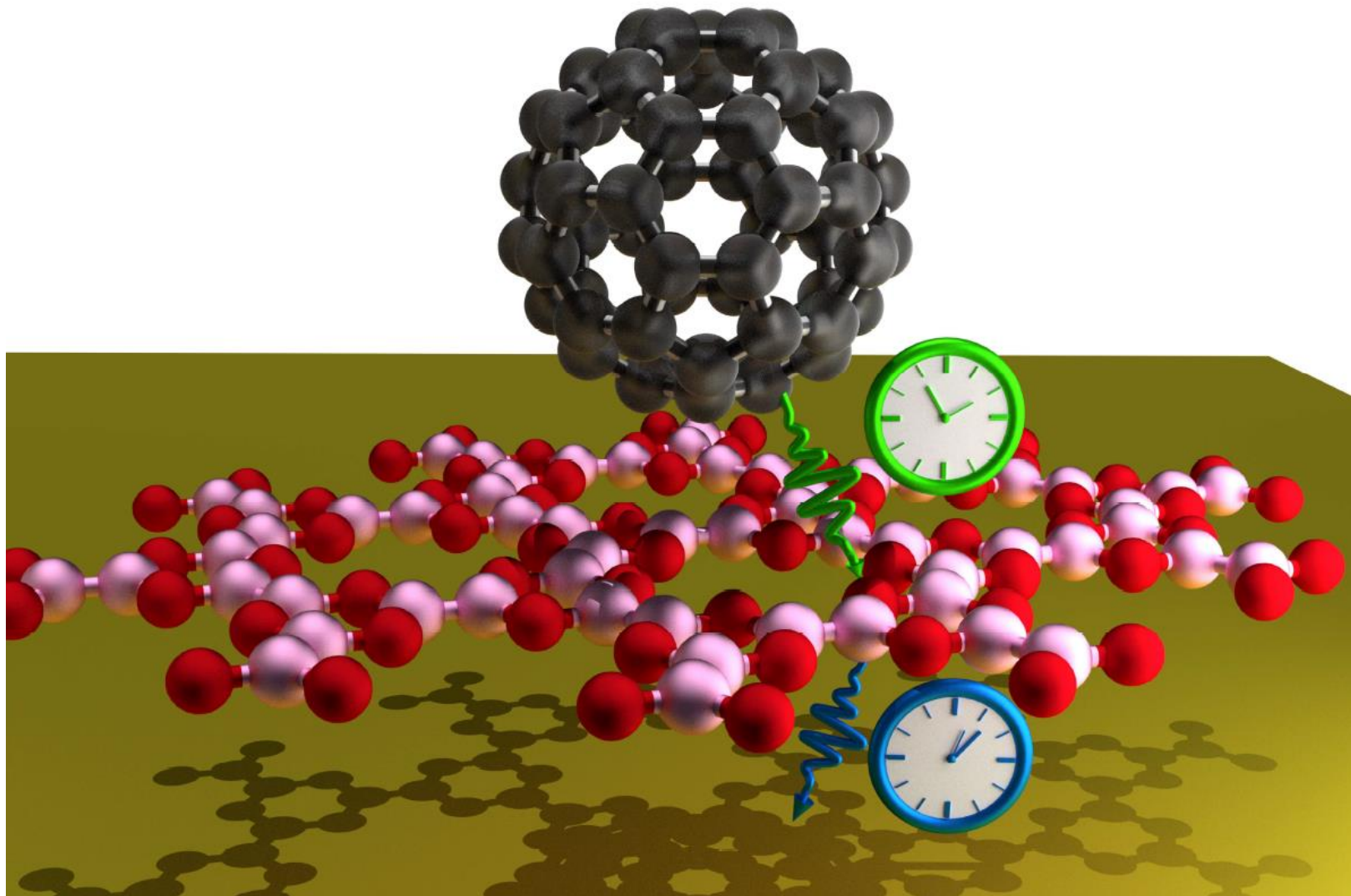
Biosensors,
gas separators



2D electrodes

Single molecule devices
All carbon electronics





Struttura elettronica delle interfacce

Dinamica elettronica

Uso di gruppi funzionali per ottimizzare le proprietà elettroniche

Contenuti del corso:

Crisi della meccanica classica e sviluppo della meccanica quantistica.

I postulati della meccanica quantistica.

Richiami di algebra lineare, probabilità

Soluzione dell' equazione di Schrödinger per potenziali costanti nel tempo.

Particella libera e pacchetto d'onde.

Particella in buca infinita. Barriera finita ed effetto tunnel. Oscillatore armonico

Coordinate sferiche ed equazione di Schrödinger 3D. Separazione delle variabili radiale ed angolari.

Atomo di idrogeno.

Il momento angolare e lo spin.

Problemi a più particelle: Atomo di elio e particelle identiche

Introduzione a teoria di perturbazione non dipendente dal tempo e al principio variazionale.

Introduzione alla struttura elettronica delle molecole.

Programma dettagliato

Crisi della meccanica classica, Quantizzazione di Plank, Relazione di de Broglie, Esperimento delle due fenditure.

Primo postulato. Introduzione al calcolo di probabilità

Valore di aspettazione e varianza. Calcolo della varianza. Passaggio da distribuzioni discrete a distribuzioni continue

Basi complete ortonormali degli spazi vettoriali. Notazione di Dirac (*Bra e Ket*). Operatori lineari.

Operatore trasposto coniugato. Gli operatori hermitiani

Postulato 2. Rappresentazione posizione e operatore momento.

Dimostrazione delle 2 proprietà degli operatori hermitiani ed enunciazione della 3 proprietà

Postulato 3. Misura in MQ. Probabilità di misura di un certo autovalore

Misure in sequenza

Commutatore e variabili compatibili. Deviazione standard in MQ. Disuguaglianza di Schwarz.

Derivazione del Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Commutazione $[x,p]$. Definizione di CSCO. Operatore proiezione

Equazione di Schrödinger e quarto postulato.

Conservazione della normalizzazione. Equazione in notazione bra e ket

Teorema di Ehrenfest e dimostrazione del teorema di Ehrenfest.

Equazione di Schrödinger a potenziale costante risolta con separazione delle variabili spazio-tempo.

Stati stazionari. Combinazione di stati stazionari. Equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo

Buca infinita: stati e autovalori

Evidenza per il caso modello di buca infinita dei principali aspetti della MQ:

energia di punto zero, variazione dei valori di aspettazione delle osservabili, effetto della misura.

Esempio di applicazione nel calcolo degli stati del butadiene.

Introduzione alle serie e alla trasformata di Fourier. Soluzione Eq. Schrodinger per particella libera

Costruzione del pacchetto d'onde. Definizione di velocità di fase e velocità di gruppo.

Funzione delta di Dirac e cenni alla ortonormalità alla Dirac.

Descrizione del problema di barriera finita e dell'effetto tunnel quantistico. Condizioni di continuità in problema di scattering.

Microscopio STM: principio di funzionamento

Oscillatore armonico classico. Riduzione al problema ad un corpo del problema di oscillazione di due masse.

Approssimazione armonica delle oscillazioni molecolari.

Operatori $a+$ $a-$, Hamiltoniana dell'oscillatore armonico scritta in funzione di $a+a-$

Stato fondamentale ed energia di stato fondamentale per l'oscillatore armonico 1D.

Forma delle soluzioni dell'oscillatore armonico, espressione di x e p in funzione degli operatori $a+$ e $a-$.

Equazione di Schrodinger 3D.

Particella in scatola cubica.

Potenziali radiali: passaggio alle coordinate sferiche e forma dell'Equazione di Schrodinger in coordinate sferiche.

Separazione delle coordinate radiale e angolari.

Forma della soluzione della parte angolare: le armoniche sferiche e i numeri l e m .

Forma delle soluzioni della parte radiale dell'equazione di Schrodinger per l'atomo di idrogeno.

Numero quantico principale n e degenerazione dello spettro di idrogeno. Formula di Rydberg e serie di emissioni principali.

Definizione di momento angolare. Momento angolare in coordinate cartesiane. Derivazione delle proprietà di commutazione. Operatori $L+$ e $L-$

Momento angolare in coordinate sferiche (solo definizione). Autovalori e autovettori. Momento angolare e atomo di idrogeno.

Gli orbitali atomici: forma e numeri quantici.

Densità di probabilità radiale. Valore di aspettazione del raggio orbitale. Valore più probabile del raggio orbitale.

Armoniche sferiche e trasformazione in armoniche sferiche reali per la rappresentazione grafica degli orbitali. Raggio di Bohr ridotto.

Regole di selezione nelle transizioni elettroniche e spettro di emissione dell'idrogeno (solo cenno).

Effetto Zeeman semplificato, rapporto giromagnetico dell'elettrone.

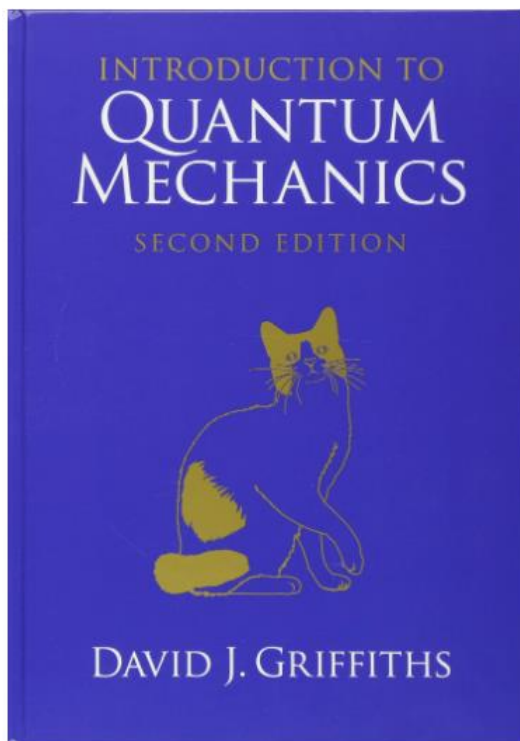
Esperimento di Stern-Gerlach (qualitativo).

Spin: operatori di spin per l'elettrone, matrici di Pauli, misura di S_z
Autovalori e autovettori delle matrici di spin
Misura di S_x su autostato di S_z
Somma di spin, somma di momenti angolari
Calcolo dei coefficienti con l'utilizzo degli operatori di spostamento per il caso di due particelle.
Coefficienti di Clebsch Gordan: utilizzo della tavola
Concetto di spin-orbitali. Misura di osservabili su combinazione lineare di spin-orbitali.
Calcolo della costante di moltiplicazione per il problema agli autovalori degli operatori di spostamento.
Teoria delle perturbazioni indipendenti da tempo: perturbazioni al primo grado su stati non degeneri.
Teorema per l'estensione della teoria non degenera a stati degeneri (solo enunciato).
Introduzione alle correzioni relativistiche, di Lamb e di struttura iperfine. Interazione spin-orbita
Termine spettroscopico e livelli atomo di idrogeno con correzioni spin-orbita.
Introduzione al problema delle particelle identiche.
Postulato del principio di simmetria.
Due particelle: casi di particelle distinguibili, fermioni indistinguibili, bosoni indistinguibili. Integrali di scambio
Determinanti di Slater.

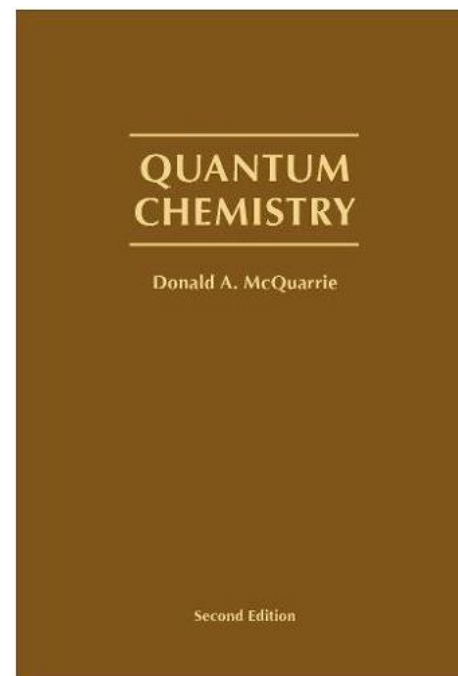
Soluzione approssimata per l'atomo di elio.
Unità atomiche, Hamiltoniana in unità atomiche.
Atomo di elio: approccio perturbativo.
Principio variazionale.
Orbitali di Slater
Metodo di Hartree Fock applicato all'elio. Orbitali di Slater.
Approssimazione di Koopman per l'energia di ionizzazione.
Atomo di elio: energia di correlazione e interazione di configurazione
Estensione del metodo HF ad atomi con più elettroni (solo introduzione al problema e trattazione qualitativa)

Configurazione elettronica e Aufbau con regola di Madelung.
Accoppiamento dei momenti angolari L-S: il momento angolare totale J.
Termine spettroscopico del carbonio. Regole di Hund.
Problema equazione secolare.

Principio variazionale ed equazione secolare
Applicazione del determinante secolare al problema di buca infinita.
Approssimazione di Born Oppenheimer e separazione delle parti elettroniche e nucleari nella hamiltoniana di molecole.
Orbitali molecolari e metodo MO-LCAO.
Molecola H_2^+ : determinante secolare. Orbitale legante e antilegante.
Molecola H_2 . Soluzione come determinante di Slater di orbitali molecolari.
Interazione di configurazione di orbitali molecolari.
Molecole biatomiche: introduzione alla struttura elettronica
Cenni a molecole più grandi (esempio dell'etilene) e all'ibridizzazione degli orbitali.



David J. Griffiths, Quantum Mechanics
second edition



Atomi e molecole

Donald A. McQuarrie, Quantum Chemistry
Second edition

Per gli argomenti trattati in modo diverso rispetto a questi testi verranno forniti degli schemi a supporto delle lezioni.

!! Schemi e problemi forniti su moodle **NON** sono esaustivi, ma da intendersi come materiale di supporto agli appunti presi a lezione e ai testii!!

Modalità di esame: esame orale.

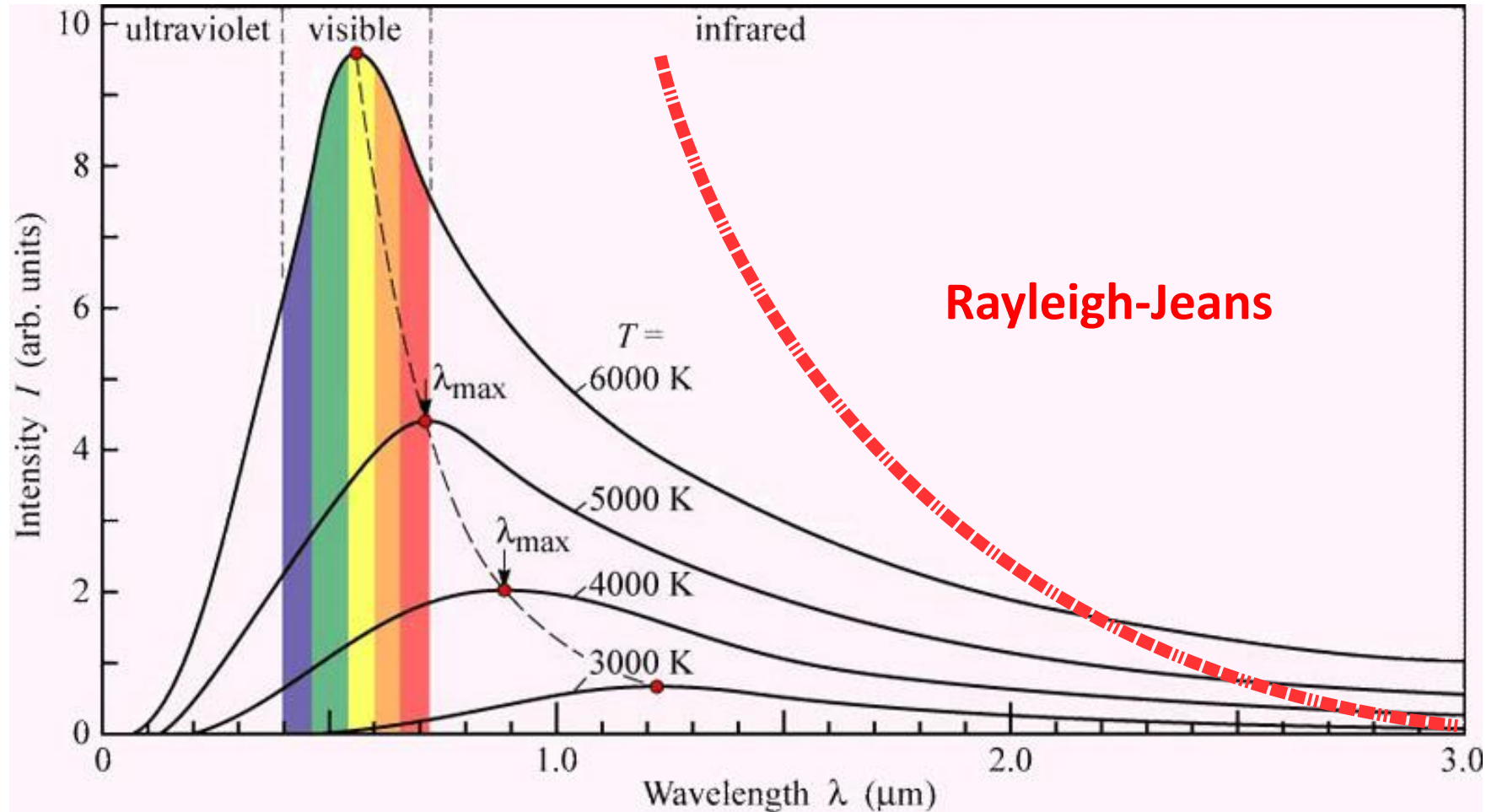
Crisi della meccanica classica e nascita della meccanica quantistica

1886 – Hertz: Fenomenologia dell'effetto fotoelettrico

1897 – Scoperta dell' elettrone (J.J. Thomson)

1900 – Legge di Rayleigh-Jeans per il corpo nero

Radiazione di corpo nero



Trattazione classica: legge di Rayleigh-Jeans

Problema: funziona bene ad alte λ , molto meno a energie più alte

catastrofe ultravioletta

Crisi della meccanica classica e nascita della meccanica quantistica

1886 – Hertz: Fenomenologia dell'effetto fotoelettrico

1897 – Scoperta dell' elettrone (J.J. Thomson)

1900 – Legge di Rayleigh-Jeans per il corpo nero

1900 – Planck: quantizzazione dell'energia

Per chi vuole approfondire: McQuarrie, capitolo 1

Crisi della meccanica classica e nascita della meccanica quantistica

1886 – Hertz: Fenomenologia dell'effetto fotoelettrico

1897 – Scoperta dell' elettrone (J.J. Thomson)

1900 – Legge di Rayleigh-Jeans per il corpo nero

1900 – Planck: quantizzazione dell'energia

1905 – Einstein: Effetto fotoelettrico

Crisi della meccanica classica e nascita della meccanica quantistica

1886 – Hertz: Fenomenologia dell'effetto fotoelettrico

1897 – Scoperta dell' elettrone (J.J. Thomson)

1900 – Legge di Rayleigh-Jeans per il corpo nero

1900 – Planck: quantizzazione dell'energia

1905 – Einstein: Effetto fotoelettrico

1915 – Bohr: Modello atomico

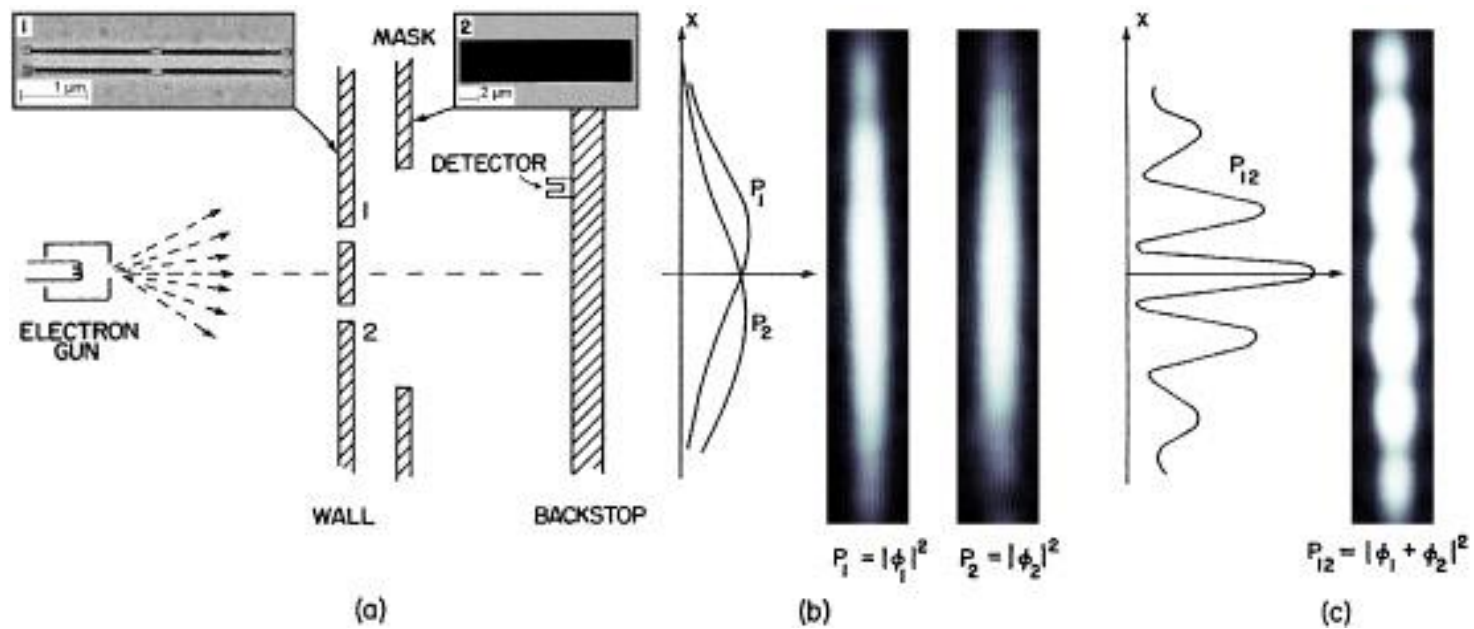
1924 – de Broglie: dualità onda corpuscolo anche per la materia

Crisi della meccanica classica e nascita della meccanica quantistica

- 1886 – Hertz: Fenomenologia dell'effetto fotoelettrico
- 1897 – Scoperta dell' elettrone (J.J. Thomson)
- 1900 – Legge di Rayleigh-Jeans per il corpo nero
- 1900 – Planck: quantizzazione dell'energia
- 1905 – Einstein: Effetto fotoelettrico
- 1915 – Bohr: Modello atomico
- 1924 – de Broglie: dualità onda corpuscolo anche per la materia
- 1925 – Schrödinger-Heisenberg: formulazione meccanica quantistica
- 1926 – Born: interpretazione della funzione d'onda e della misura
- 1926 – Diffrazione di elettroni (Thomson figlio...)
- 1928 – Equazione di Dirac

Per chi vuole approfondire: McQuarrie, capitolo 1

Esperimento delle due fenditure



Richard P. Feynman, *gedanken experiment*,

Controlled double-slit electron diffraction

Roger Bach^{1,3}, Damian Pope², Sy-Hwang Liou¹
and Herman Batelaan^{1,3}

¹ Department of Physics and Astronomy, University of Nebraska-Lincoln,
Theodore P Jorgensen Hall, Lincoln, NE 68588, USA

² Perimeter Institute for Theoretical Physics, 31 Caroline ST N, Waterloo,
Ontario N2L2Y5, Canada

E-mail: roger.bach@huskers.unl.edu and hbatelaan2@unl.edu

New Journal of Physics **15** (2013) 033018 (7pp)

